Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics, Vol. 5, N. 1, 2017.

Trabalho apresentado no CNMAC, Gramado - RS, 2016.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

---

Simulação de escoamento de água em canal entre placas paralelas utilizando o método do reticulado de Boltzmann

Vanderlei Galina[1]
PPGMNE, Programação Matemática, UFPR, Curitiba, PR
Jocelaine Cargnelutti[2]
PPGMNE, Programação Matemática, UFPR, Curitiba, PR
Eloy Kaviski[3]
Departamento de Hidráulica e Saneamento, UFPR, Curitiba, PR
Liliana Madalena Gramani[4]
Departamento de Matemática, UFPR, Curitiba, PR
Adilandri Mércio Lobeiro[5]
Departamento Acadêmico de Matemática, UTFPR, Campo Mourão, PR

Resumo. O método do reticulado de Boltzmann (LBM) possui equação governante caracterizada pelas etapas de transmissão e colisão, e pode ser visto como uma forma discretizada da equação cinética de Boltzmann em que somente são mantidos os detalhes moleculares essenciais para recuperar o comportamento macroscópico. O método é eficiente na simulação de escoamento de fluidos, mostrando-se competitivo nas aplicações de mecânica dos fluidos computacional, sendo especialmente útil em aplicações com geometrias complexas. O objetivo deste trabalho é utilizar o LBM para simular o escoamento de água em um canal entre placas paralelas. Para isto, foram usadas condições de contorno *bounce back* e Zou-He. Fez-se a comparação entre as soluções numérica e analítica, para a validação do método.

Palavras-chave. Método do Reticulado de Boltzmann, Métodos Numéricos, Simulação Numérica, Escoamento de água.

1 Introdução

Com uma abordagem diferente quando comparado aos métodos numéricos tradicionais, o LBM não utiliza discretizações nas equações macroscópicas governantes do escoamento. A ideia principal do LBM é fazer a ponte entre a microescala e a macroescala por não considerar o comportamento individual das partículas, mas o comportamento de um conjunto de partículas. O método é originário historicamente do autômato celular de gás em rede (LGCA), sendo este uma classe particular dos autômatos celulares (CA) [15].

---

[1]vanderleigalina@gmail.com
[2]jocelainecargnelutti@gmail.com
[3]eloy.dhs@gmail.com
[4]l.gramani@gmail.com
[5]adilandri@gmail.com

Mudanças foram propostas para melhorar o LBM desde sua introdução na década de 1980. O método passou por refinamentos e extensões e tornou-se promissor na simulação de escoamentos de fluidos. Por exemplo, o LBM obteve êxito na modelagem de escoamento de água com distribuição não-hidrostática de pressão [14], fluxo sanguíneo [6], escoamento de águas rasas com ou sem turbulência [15], escoamentos multifásicos em meios porosos [2,12], escoamento de fluidos com transferência de calor no interior de microcanais [13] e aplicações nas indústrias aeroespacial e automotiva [4, 11].

O LBM pode gerar soluções numéricas precisas, por meio de cálculos aritméticos simples, para problemas que envolvem equações diferenciais e geometrias complexas. O algoritmo é de simples implementação e é possível otimizar o código por meio do uso da computação paralela. Por outro lado, deve-se conhecer bem o problema e incorporar adequadamente as características físicas para que a simulação retorne resultados precisos [15].

Pode-se identificar no LBM três elementos principais: o reticulado, a função distribuição de equilíbrio e o operador de colisão. O reticulado descreve as possíveis direções de movimento das distribuições de uma partícula. A função distribuição de equilíbrio deve ser escolhida de forma que seja possível a recuperação das equações de Navier Stokes através de uma expansão assintótica multiescala de Chapman-Enskog na equação do reticulado de Boltzmann (LBE) e assumindo que o número de Mach (Ma) é suficientemente pequeno. O operador de colisão introduzido por Bhatnagar, Gross e Krook (BGK) descreve a colisão como um processo de relaxamento para o estado de equilíbrio local [7].

Ressalta-se a importância de questões relacionadas com a instabilidade numérica. Por exemplo, as aplicações envolvendo escoamentos reais de água possuem números de Reynolds muito altos e as simulações são realizadas com o parâmetro de relaxamento muito próximo do limite inferior, $\tau = 1/2$ [10]. Escoamentos com altos números de Reynolds exigem refinamento da malha e, consequentemente, alto custo computacional. Nestes casos, avalia-se a possibilidade de otimizar o tempo de processamento utilizando computação paralela ou utilizar outro método numérico que, dependo do problema, pode ser mais adequado [15]. O LBM requer o cuidado de estimar e ajustar os parâmetros de simulação, possibilitando otimização do custo computacional e precisão dos resultados [6].

Utilizou-se um único tempo de relaxamento neste trabalho. Porém, modelos de colisão diferentes do BGK, com múltiplos tempos de relaxamento, podem ser observados no trabalho de Philippi et al. [9].

Este trabalho faz parte de um estudo maior, cuja intenção é simular escoamentos em canais naturais. O interesse em utilizar o LBM se ratifica, principalmente, pelo fato de ser uma alternativa potencial para simular escoamento de água sem utilizar discretizações nas equações governantes. Com código de simples implementação e a possibilidade de utilizar computação paralela, o LBM mostra-se um método promissor na dinâmica de fluidos computacional, respeitadas as restrições já mencionadas.

2 Método do Reticulado de Boltzmann

De acordo com Chen e Doolen [3], a ideia principal do LBM é elaborar modelos cinéticos simplificados que incorporem a física essencial de processos microscópicos ou mesoscópicos,

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0326

de forma que as características na escala macroscópica sejam fiéis às equações, não sendo necessário fazer a discretização das equações que governam a dinâmica do fluido. As principais etapas no LBM são os processos de transmissão e colisão, e estes são realizados por meio da equação (1), que é a LBE com aproximação BGK:

$$f_i\left(\vec{x}+\vec{e_i}\Delta x,\ t+\Delta t\right)-f_i\left(\vec{x},\ t\right)=\frac{1}{\tau}\left[f_i^{eq}\left(\vec{x},\ t\right)-f_i\left(\vec{x},\ t\right)\right],\ \ i=1,...,l, \tag{1}$$

onde f_i é a função distribuição de partículas, f_i^{eq} é a função distribuição de equilíbrio, τ é o parâmetro de relaxamento, Δx é o espaçamento da malha, Δt é o incremento no tempo, $\vec{e_i}$ são as possíveis direções de movimento de uma partícula na malha e l é o número de direções do reticulado escolhido.

A função distribuição de partículas f_i apresenta a probabilidade de uma partícula se deslocar de um nó para outro, em um determinado instante de tempo. A função distribuição de equilíbrio f_i^{eq} é construída de forma que o operador de colisão em (1) tenda para zero. Adotando o reticulado $D2Q9$ [15], a função distribuição de equilíbrio é dada neste artigo pela expressão (2), que, por sua vez, depende da densidade e da velocidade macroscópicas:

$$f^{eq}=w_i\rho\left[1+\frac{3\left(\vec{c}\,.\,\vec{u}\right)}{c^2}+\frac{9}{2}\frac{\left(\vec{c}\,.\,\vec{u}\right)^2}{c^4}-\frac{3}{2}\frac{\left(\vec{u}\,.\,\vec{u}\right)}{c^2}\right], \tag{2}$$

onde ρ é o valor macroscópico da massa específica, $\vec{c}\left(\vec{x},t\right)=c\vec{e_i}\left(\vec{x},t\right)$ é o vetor velocidade das micropartículas, $c=\frac{\Delta x}{\Delta t}$ é a intensidade do vetor, $\vec{u}\left(\vec{x},t\right)$ é a velocidade hidrodinâmica e o termo w_i são pesos associados a cada uma das direções do modelo. No caso do modelo D2Q9, os valores de w_i são [1]:

$$w_i=\begin{cases}4/9 & \text{se } i=0\\ 1/9 & \text{se } i=1,2,3,4\\ 1/36 & \text{se } i=5,6,7,8\end{cases}, \tag{3}$$

onde $i=0$ é o centro do reticulado, $i=1,\ 2,\ 3,\ 4$ são as direções cardeais e $i=5,\ 6,\ 7,\ 8$ são as direções colaterais.

A viscosidade cinemática é uma propriedade do fluido e está relacionada com o parâmetro de relaxamento τ por meio da expressão (4) [15]:

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2}=\frac{2\tau-1}{6\nu},\qquad \tau>1/2. \tag{4}$$

A equação (4) é uma condição para que o método do reticulado de Boltzmann possa representar um escoamento incompressível modelado pelas equações de Navier-Stokes.

A densidade e a velocidade macroscópicas (5) podem ser recuperadas por meio de um somatório que envolve a função distribuição de partículas f_i [3]:

$$\rho(\vec{x},t)=\sum_i f_i(\vec{x},t),\qquad \rho\vec{u}(\vec{x},t)=\sum_i f_i(\vec{x},t)c\vec{e_i}. \tag{5}$$

3 Condições de Contorno

A representação adequada das características físicas do problema por meio das condições de contorno é um fator crucial para a estabilidade e precisão das simulações. Optou-se, neste artigo, por usar duas condições de contorno: *Bounce Back* nas placas superior e inferior, e Zou-He na entrada e saída do canal.

3.1 Condição de Contorno *Bounce Back*

A condição de contorno *bounce back* pode ser imposta sobre partículas que entram em contato com paredes ou obstáculos sólidos e tem o objetivo de simular o atrito viscoso entre o sólido e o fluido. Quando aplicada, esta condição de contorno inverte o sentido do movimento da partícula e mantém a direção. Esta condição de contorno é bastante usada e garante não-escorregamento, ou seja, a velocidade do fluido é nula nas paredes e obstáculos sólidos [3].

3.2 Condição de Contorno Zou-He

A abordagem feita por Zou e He [16] impõe condições de contorno de velocidade exatamente nos centros das células que estão no contorno. A ideia destes modelos é manter as etapas de propagação e colisão normais para todas as células, porém introduzindo um cálculo adicional antes da etapa de colisão, para calcular a quantidade de partículas f_i's que se deslocam em algumas direções das células de fronteira. Após a etapa de propagação, as f_i's que têm origem na fronteira são conhecidas nas células de fronteira (ver Figura 1).

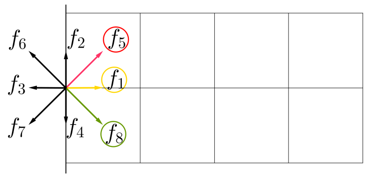


Figura 1: Condição de contorno de Zou-He na parede esquerda com f_1, f_5 e f_8 desconhecidas.

Este tipo de condição de contorno é interessante porque preserva a massa, possui acurácia de segunda ordem e também é apropriada para contornos retilíneos. Para estabelecer as f_i's desconhecidas, conforme Figura 1, usa-se *bounce back* de não equilíbrio na direção perpendicular à parede esquerda. Além disso, usa-se as expressões em (5) e obtém-se:

$$f_1 = f_3 + \frac{2\rho u_x}{3},\ f_5 = f_7 - \frac{f_2 - f_4}{2} + \frac{\rho u_y}{2} + \frac{\rho u_x}{6}\ \ e\ \ f_8 = f_6 + \frac{f_2 - f_4}{2} - \frac{\rho u_y}{2} + \frac{\rho u_x}{6}. \quad (6)$$

4 Estudo de Caso

O escoamento de um fluido incompressível com perfil parabólico em regime estacionário ao longo de um tubo ou canal entre placas fixas, com paredes impermeáveis e

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0326

não-escorregadias devido à diferença de pressão entre os extremos do canal, é um escoamento de Poiseuille [5].

As equações governantes deste problema são as equações de Navier-Stokes com simplificações, como, por exemplo, com pressão hidrostática. O fluido é Newtoniano e incompressível. Depois de algumas simplificações, tem-se a seguinte equação diferencial:

$$\frac{d^2u}{dy^2} = \frac{1}{\mu}\frac{dp}{dx}. \tag{7}$$

As soluções para as velocidades nas direções x e y são, respectivamente [5]:

$$u_x\left(x,y\right) = -\frac{1}{2\mu}\frac{\partial p}{\partial x}\left(L_y y - y^2\right), \quad u_y\left(x,y\right) = 0, \tag{8}$$

onde p é a pressão, $\partial p/\partial x$ é a variação da pressão, μ é a viscosidade dinâmica que é dada por $\mu = \rho\nu$, com densidade ρ e viscosidade cinemática ν, u_x é a componente horizontal da velocidade, u_y é a componente vertical da velocidade e L_y é a largura do canal.

A velocidade máxima do escoamento de Poiseuille ocorre em $y = L_y/2$ e a velocidade nula ocorre nas paredes direita e esquerda, construindo um perfil parabólico de velocidade.

5 Resultados e Discussões

Os parâmetros reais do problema são: o comprimento do canal é $L_x = 1\,m$, a largura é $L_y = 0,1\,m$, a densidade da água é $\rho = 1000\,kg/m^3$, a viscosidade cinemática da água é $\nu = 1 \times 10^{-6}\,m^2/s$ e a velocidade do escoamento é $u_{max} = 0,002\,m/s$. O número de Reynolds associado é $R_e = 200$.

De acordo com Mohamad [8], uma maneira de realizar a simulação no LBM é transformar os parâmetros físicos em parâmetros adimensionais na malha, em termos de reticulado. Inicialmente, optou-se por um domínio computacional que é representado por uma malha retangular de 400×40 reticulados nas direções x e y, respectivamente, e velocidade no reticulado de $0,1\,m/s$. A escolha deve ser feita respeitando-se o número de Reynolds do problema. Com essas configurações, obtêm-se o parâmetro de relaxamento $\tau = 0,56$, o passo espacial $\Delta x = \Delta y = 0,0025\,m$ e o passo temporal $\Delta t = 0,125\,s$.

Na Figura 2, pode-se observar a solução numérica do escoamento de Poiseuille em unidades do reticulado. Pode-se analisar também na Figura 3 a solução numérica do escoamento para os dados físicos. Na Figura 4(a) tem-se a comparação da solução numérica e analítica no meio do canal ($x = L_x/2$), com erro máximo relativo de $0,38\%$. O número de iterações foi de 20000, gerando um tempo de 2500 segundos. Este número de iterações é justificado pela Figura 4(b), na qual se observa a convergência da velocidade para $u_{max} = 0,002\,m/s$ no ponto $(L_x/2, L_y/2)$, com o aumento do número de iterações. Utilizou-se o compilador Gfortran em um computador com processador 2.2 GHz e 16 GB de memória RAM. O tempo de processamento foi de 74 segundos.

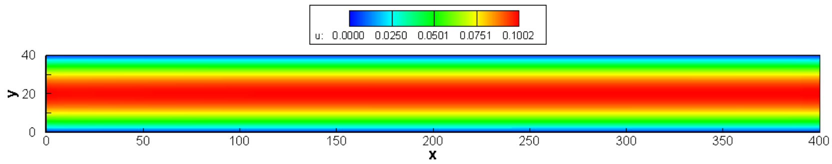


Figura 2: Solução numérica do escoamento com dados na malha.

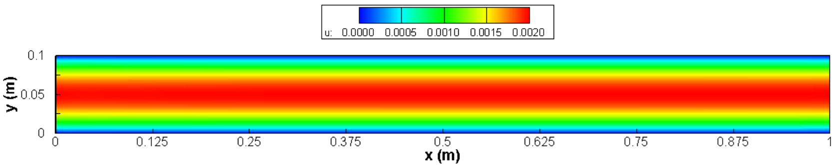
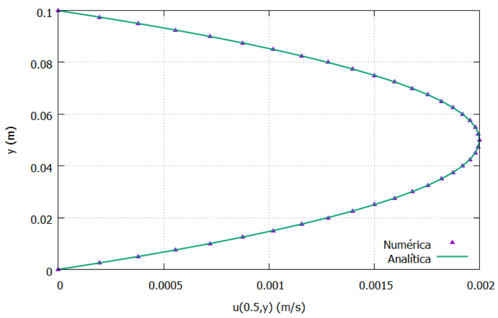
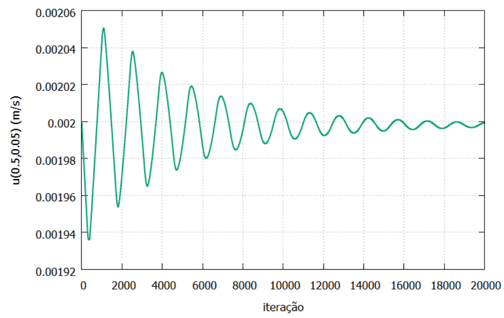


Figura 3: Solução numérica do escoamento com dados físicos.



(a) Comparação: solução analítica e numérica em $x = L_x/2$.



(b) Convergência da velocidade em $(L_x/2, L_y/2)$

Figura 4: Solução analítica e numérica para o escoamento Poiseuille.

6 Conclusão

A aplicação do LBM mostrou-se eficaz na simulação do escoamento de água em canal pela concordância obtida com a solução analítica do escoamento de Poiseuille. Apesar do escoamento de Poiseuille ser simples, tem-se a dificuldade de simular o escoamento de água, pois a viscosidade cinemática da água é muito baixa e acarreta dificuldade na calibração dos parâmetros. Observou-se que o erro máximo relativo de $0,38\%$ ocorreu em alguns pontos próximos das paredes do canal. Com isto, entende-se que é importante fazer uma melhor abordagem da condição de contorno nas paredes.

Referências

[1] T. Abe. Derivation of the Lattice Boltzmann Method by means of the discrete ordinate method for the Boltzmann Equation, *Journal of Computational Physics*, 131:241–246, 1997.

[2] R. Benzi, S. Succi, and M. Vergassola. The Lattice Boltzmann Equation: theory and applications, *Physics Reports* , 222(3):145–197, 1992.

[3] S. Chen and G. D. Doolen. Lattice Boltzmann Method for fluid flows, *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30(1):329–364, 1998.

[4] F. R. do Amaral. Estudo do efeito aeroacústico de um selo localizado na cova do eslate, Dissertação de Mestrado, USP, 2015.

[5] R. W. Fox and A. T. McDonald. *Introduction to Fluid Mechanics*. John Wiley e Sons, United States of America , 1998.

[6] D. R. Golbert. Método de Lattice Boltzmann em Hemodinâmica Computacional: interações fluido-estrutura e modelos acoplados 1D-3D. Tese de Doutorado, LNCC, 2013.

[7] X. He and L. S. Luo. A priori derivation of the lattice Boltzmann equation, *Physical Review E*, 55(6):6333–6336, 1997.

[8] A. A. Mohamad. *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*. Springer, London, 2011.

[9] P. C. Philippi, L. A. Hegele Jr, R. Surmas, D. N. Siebert, and L. O. E. Santos. From the Boltzmann to the lattice-Boltzmann equation: beyond BGK collision models, *International Journal of Modern Physics C*, 18:556–565, 2007.

[10] J. Sterling and S. Chen. Stability Analysis of Lattice Boltzmann Methods, *Journal of Computational Physics*, 123(1):196–206, 1996.

[11] S. Succi. *The Lattice Boltzmann Equation for Dynamics and Beyond*. Oxford University Press Inc., New York, 2001.

[12] R. Surmas. Simulação de fenômenos termo-fluidodinâmicos pelo emprego do método de diferenças finitas à solução da equação de Boltzmann. Tese de Doutorado, UFSC, 2010.

[13] R. Zarita and M. Hachemi. Microchannel Fluid Flow and Heat Transfer By Lattice Boltzmann Method. In *4th Micro and Nano Flows Conference*, Londres, Inglaterra, 2014.

[14] Z. Zhao, P. Huang, Y. Li, and J. Li. A lattice Boltzmann method for viscous free surface waves in two dimensions, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 71:223–248, 2013.

[15] J. G. Zhou. *Lattice Boltzmann Method for Shallow Water Flows*. Springer, New York, 2004.

[16] Q. Zou and X. He. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids*, 9(6):1591–1598, 1997.

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0326